



TITLE:

多価カチオン二次電池正極材料の 反応機構解明

AUTHOR(S):

森, 拓弥

CITATION:

森, 拓弥. 多価カチオン二次電池正極材料の反応機構解明. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2015, 2014: 114-114

ISSUE DATE:

2015-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/197599>

RIGHT:

多価カチオン二次電池正極材料の反応機構解明

Reaction mechanisms of the cathode material in multivalent cation batteries

人間・環境学研究科 関連環境学専攻 森 拓弥

近年のエネルギー問題への関心の高まりとともに、エネルギーを蓄積する方法として蓄電池への注目が高まっている。蓄電池は、現在、小型電子機器での利用が中心となっているが、今後、自動車や工場などで使用するために、さらに高容量を保持する蓄電池の開発が強く求められている。電気自動車用蓄電池では 500 Whkg^{-1} 以上という大きなエネルギー密度が必要であるという試算もあり、また現在主に用いられている蓄電池であるリチウムイオン二次電池の材料の資源・安全面の問題から、リチウムイオン二次電池を凌ぐ性能・特性を有するポストリチウムイオン二次電池の開発が求められている。その中で、多価カチオン二次電池は、高容量であることからリチウムイオン二次電池を超える次世代の二次電池として注目されている。特に、マグネシウムイオンをキャリアイオンとして用いるマグネシウムイオン二次電池は、マグネシウムの比較的卑な酸化還元電位 (-2.38 V VS SHE)、高い比重量容量 (2205 mAhg^{-1})、体積容量 (3837 mAhcm^{-3}) などから、高エネルギー密度化が原理的に可能であり、将来の実用化が期待されている蓄電池である。また、マグネシウムはリチウムと比較して、資源が豊富、高融点といった特長があり、低コスト化かつ高い安全性が見込める。このような利点からマグネシウムイオン二次電池はポストリチウムイオン電池として高い注目を集めている。

マグネシウムイオン二次電池の開発における最も大きな問題の一つとして、電解液が挙げられる。これまでに見出された、マグネシウムイオン二次電池で使用可能な電解液はグリニャール試薬を用いた電解液¹などがあるが、安全性に問題があるため工業的実用化は不可能であると考えられている。当研究グループでは、安全性を備えた電解液の開発を進めているが、まずはマグネシウムイオン二次電池で使用可能なグリニャール試薬を用いた電解液

($\text{Mg}(\text{AlCl}_2\text{EtBt})_2$ のテトラヒドロフラン溶液) の溶液内構造を明らかにし、その電子状態の特性を明らかにすることを行った。計算には、アクセルリス社の D-mol³ および CASTEP を用いた。マグネシウムイオンの充放電が可能な電解液では、特異な配位構造² が形成される可能性が指摘されており、その妥当性を検討している。現在、セルサイズなどの計算条件の影響を検討しており、今後、構造、電子状態について解析する。さらに、当研究グループで見出されたマグネシウムイオンの充放電が可能な電解液についても、溶液におけるマグネシウムイオンの配位構造を計算科学的に検討し、ラマン分光法などの実験結果と比較することで、マグネシウムイオンの充放電が可能な電解液における一般則を見出したいと考えている。

参考文献

- [1] D. Aurbach, Z. Lu, A. Schechter, Y. Gofer, H. Gizbar, R. Turgeman, Y. Cohen, M. Moshkovich, E. Levi, *Nature*, **407**, 6805 (2000).
- [2] D. Aurbach, R. Turgeman, O. Chusid, Y. Gofer, *Electrochem. Comm.* **3**, 252, (2001).